

IBRIDAZIONE

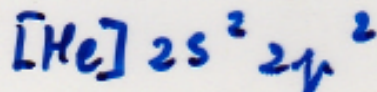
MODELLO DELL'ORBITALE di LEGAME

Approccio più semplice per descrivere la struttura elettronica di una specie sfruttando il concetto di orbitale.

METANO

Gli atomi nel formare legami usano elettroni di valenza. Quali sono gli orbitali atomici di valenza per il C e per H??

C



H

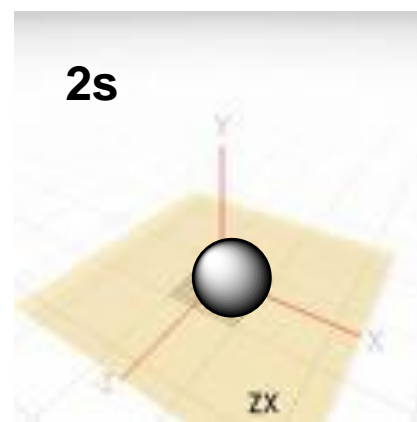
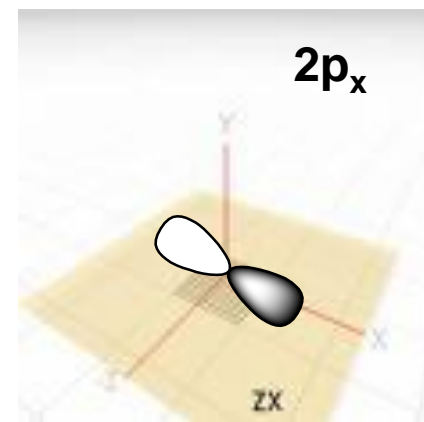
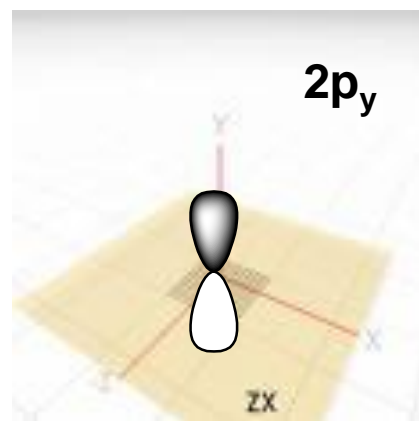
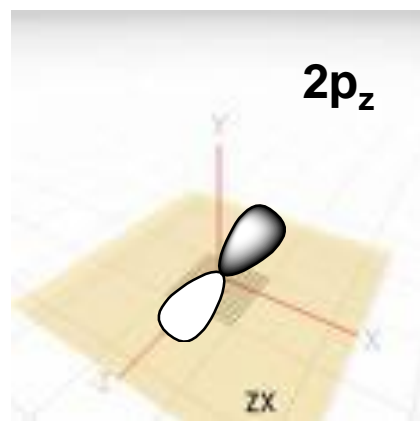


1 orbitale **s** e 3 orbitali **p**. Se i legami si instaurassero nelle stesse direzioni degli orbitali di valenza si dovrebbero avere 3 legami C-H mutuamente perpendicolari. Che fine ha fatto il quarto legame?

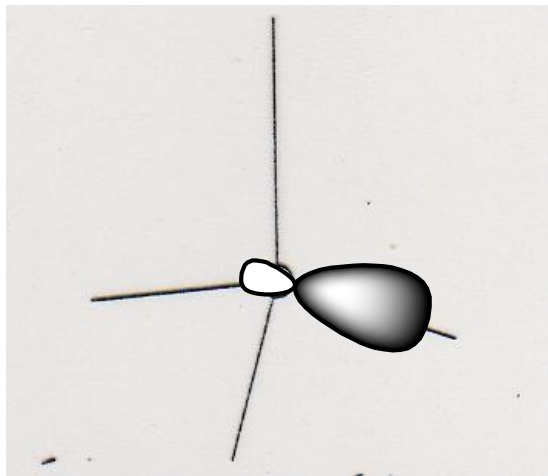
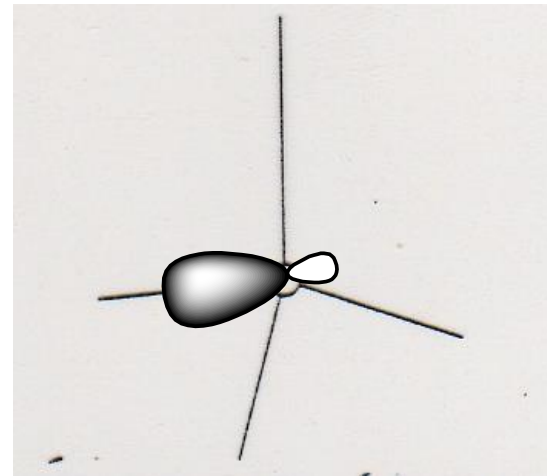
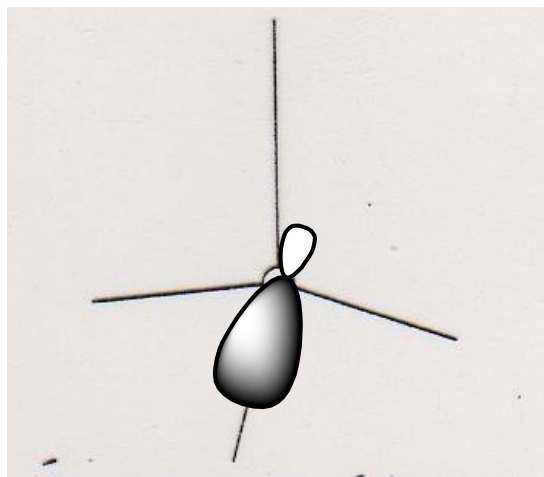
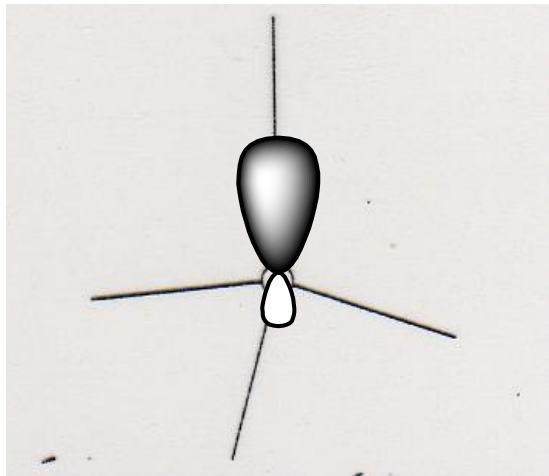
Noi sappiamo la verità, nel metano i 4 atomi di H sono ai vertici di un tetraedro regolare e l'angolo tra i legami CH (tutti equivalenti) è di 109.5° .

Si fa ricorso al concetto di **ORBITALE IBRIDO**

Combinazione
matematica
dei **4 orbitali**
2s, **2p_x**, **2p_y** e
2p_z per
generare **4**
orbitali
equivalenti di
natura ibrida



I 4 ORBITALI IBRIDI SP^3 DEL CARBONIO



Hanno la stessa forma e la stessa energia, sono diretti lungo i vertici di un tetraedro ad angoli di 109.5° gli uni rispetto agli altri. Hanno carattere s per $\frac{1}{4}$ e per i $\frac{3}{4}$ carattere p

ORBITALI di LEGAME

Si basa sull'utilizzo di orbitali ibridi per la descrizione dei legami

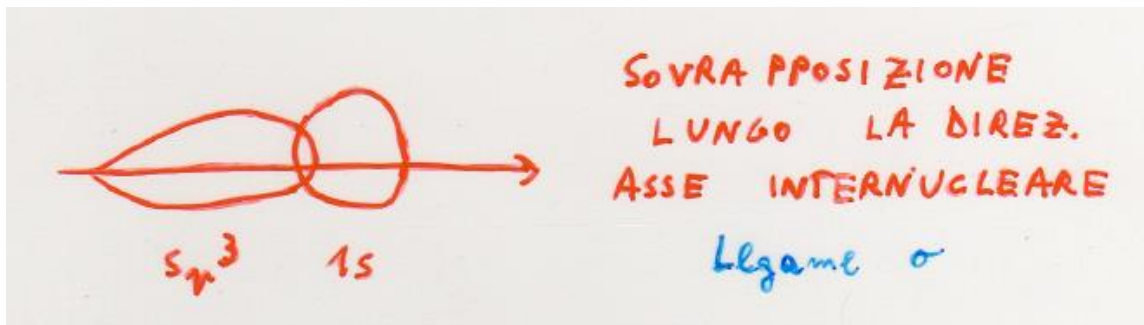
Il legame chimico viene visto come la sovrapposizione o fusione di due orbitali (**ciascuno occupato da un elettrone**) provenienti dai due atomi che instaurano tale legame.

La sovrapposizione dei due orbitali causa la formazione di una nube elettronica localizzata fra i due nuclei e che ha la funzione di unire tali nuclei.

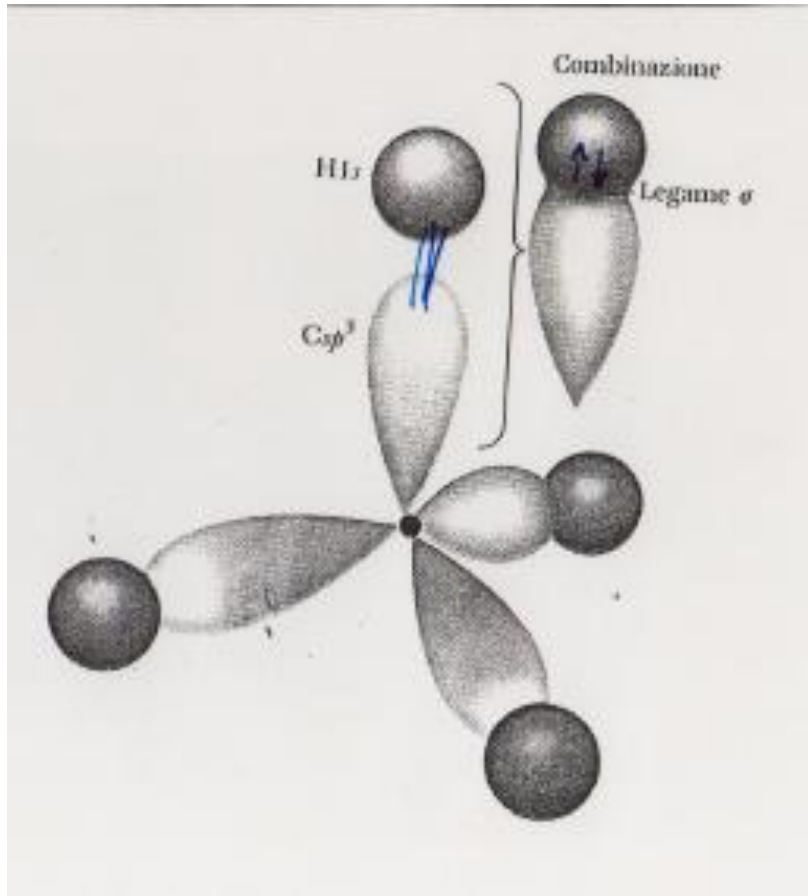
LEGAMI SIGMA (σ)

Si hanno legami sigma se la nube discussa sopra ha una geometria cilindrica rispetto la congiungente i due nuclei.

La sovrapposizione di un ibrido sp^3 ed un $1s$ origina un legame sigma.



CH₄

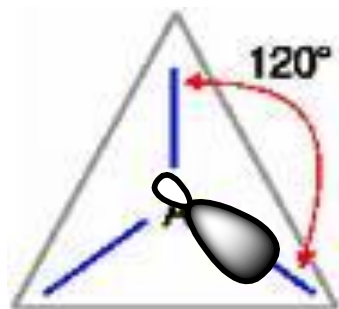
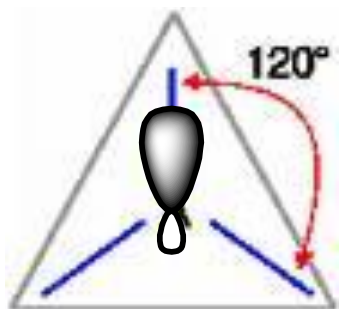
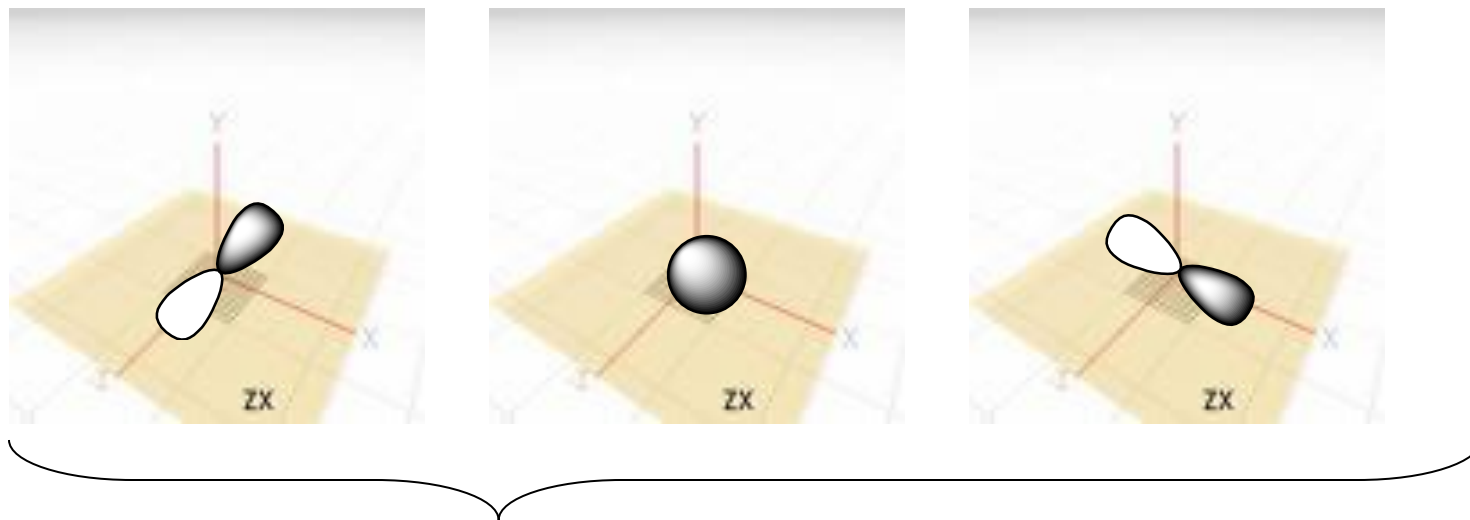


Per il metano la descrizione dei legami come

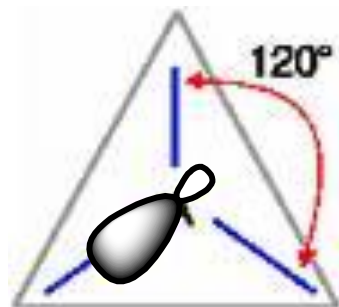
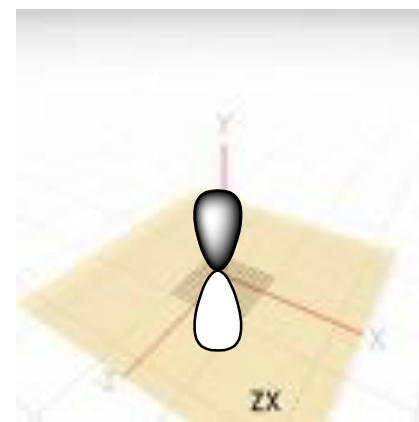
sovrapposizione di orbitali ibridi sp^3 con orbitali $1s$ per gli atomi di idrogeno porta alla descrizione geometrica corretta!!!

In ogni orbitale sp^3 c'è un elettrone così come in ogni orbitale $1s$.

I 3 ORBITALI IBRIDI SP^2 DEL CARBONIO

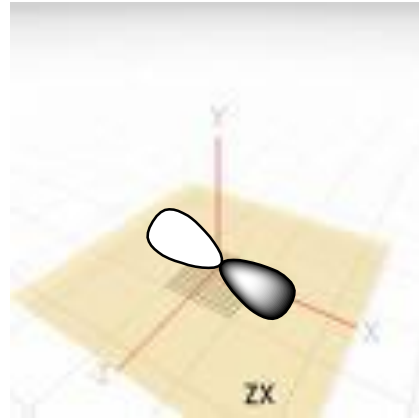
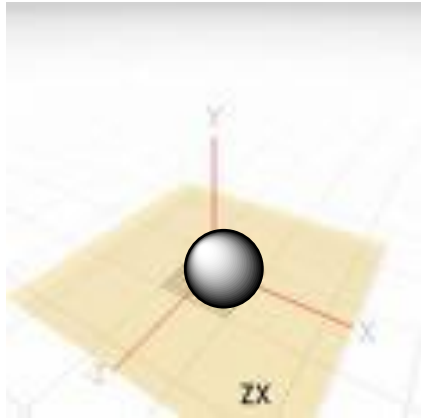


+

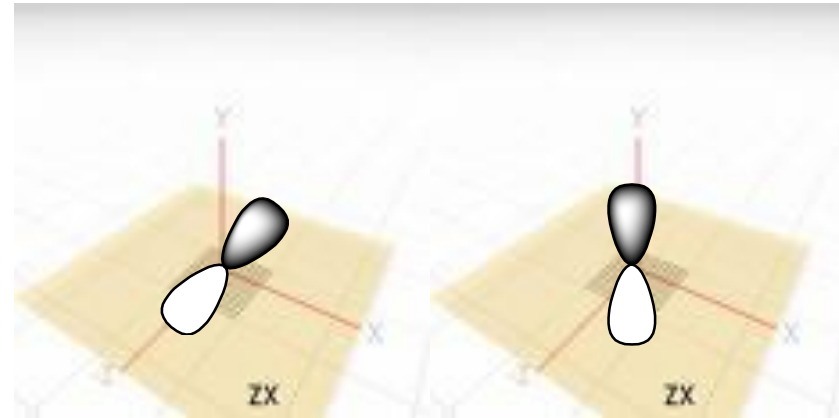
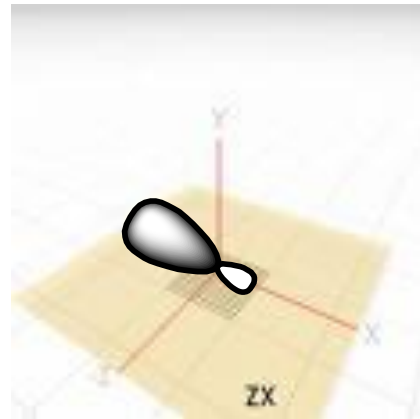
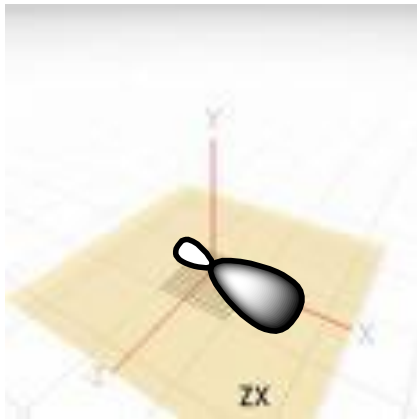


L'orbitale p_y non è stato combinato!

I 2 ORBITALI IBRIDI SP DEL CARBONIO



p_y e p_z non combinati



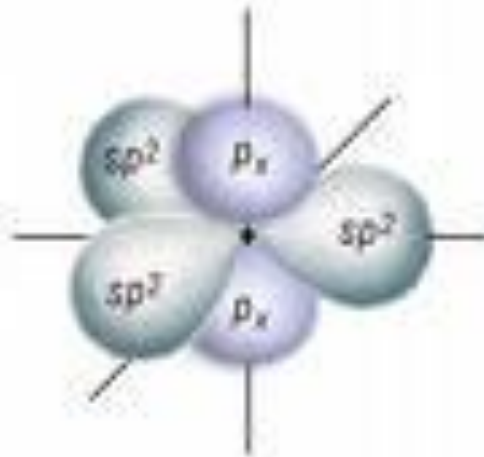
I tre orbitali sp^2 hanno $1/3$ di carattere s e $2/3$ di carattere p

I due orbitali sp hanno $1/2$ di carattere s e $1/2$ di carattere p

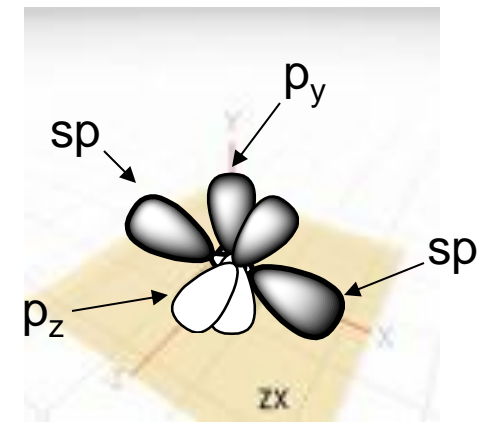
Visione di insieme dei vari ibridi



sp^3



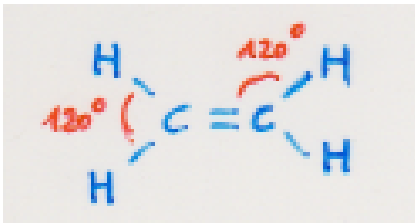
sp^2



sp

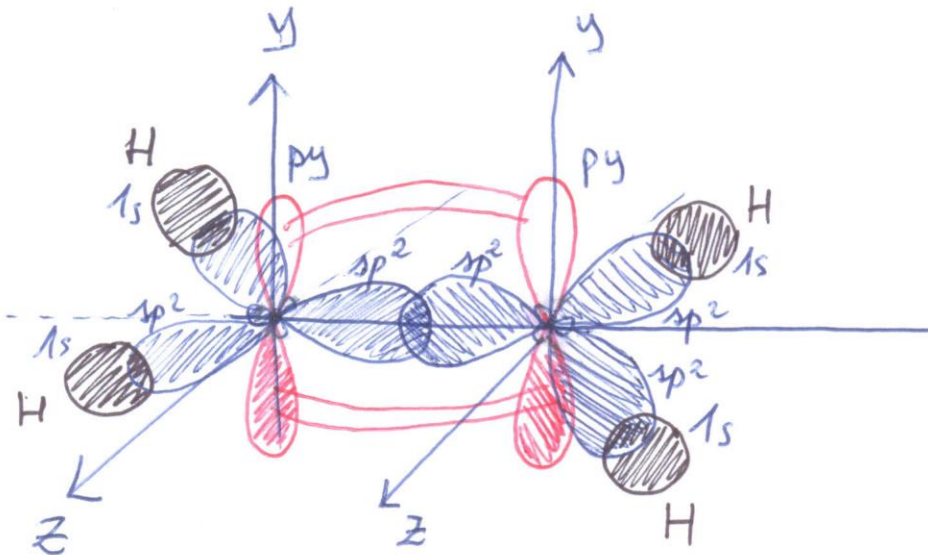
LEGAMI PI-GRECO (π)

Sono presenti nel caso di doppi o tripli legami



Etilene (doppio legame)

Ogni carbonio ha ibridazione sp^2 . Ogni orbitale sp^2 contiene 1e così come ogni orbitale 1s e ogni orbitale p_y .



Sovrapposizioni:

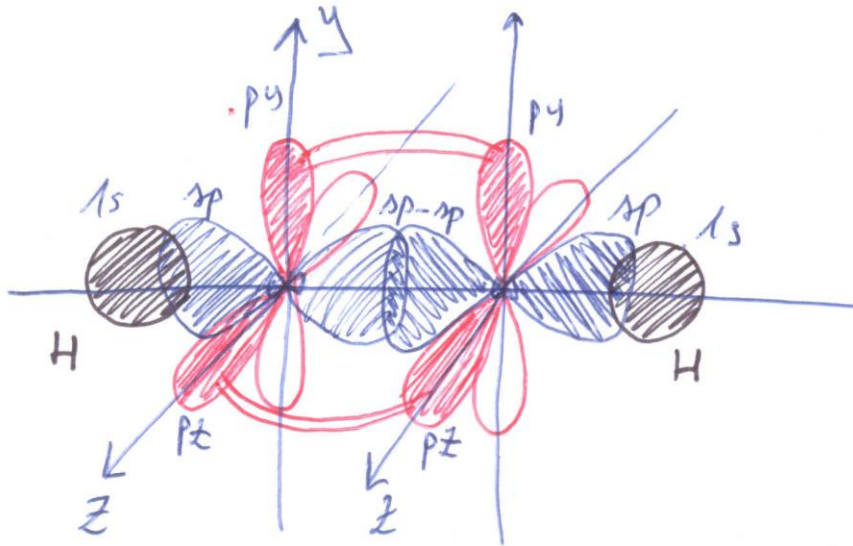
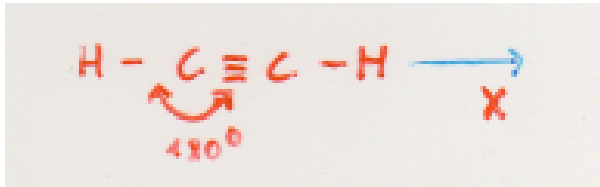
$sp^2-sp^2 \rightarrow$ legame σ

$sp^2-1s \rightarrow$ legame σ

$p_y-p_y \rightarrow$ legame π

Se a seguito della sovrapposizione di due orbitali si ottiene la formazione di una nube elettronica sopra e sotto l'asse di legame, si dice di aver ottenuto un legame **pi-greco**

Caso dell'acetilene (triplo legame)



Sovrapposizioni:

$sp-sp \rightarrow$ legame σ

$sp-1s \rightarrow$ legame σ

$p_y-p_y \rightarrow$ legame π

$p_z-p_z \rightarrow$ legame π

Riassumendo...

Legame singolo $\rightarrow \sigma$

Legame doppio $\rightarrow 1\sigma$ ed 1π

Legame triplo $\rightarrow 1\sigma$ ed 2π

Esercizio:

Sfruttando la teoria dell'orbitale di legame descrivere quali orbitali sono coinvolti nella formazione dei legami nella molecola di acqua.

Ripetere l'esercizio precedente per la molecola di BF_3

CONSIDERAZIONI ENERGETICHE

	DOPPI	LEGAMI
B (C-C)	348	KJ/mole
2 x B (C-C)	696	"
B (C=C)	612	"
3 x B (C-C)	1044	"
B (C≡C)	837	"

Da questa tabella si evince che i legami π sono più deboli dei legami σ . Per C-C $\Delta E = 84$ KJ/mole.

NON è possibile a temperatura ambiente avere libera rotazione attorno ad un doppio legame. Andrebbe perduta la sovrapposizione tra gli orbitali p che formano il legame pi-greco con conseguente rottura dello stesso.

DOPPI LEGAMI TRA ELEMENTI NON APPARTENENTI AL PERIODO II

Si=Si

P=P

Si=P

Non tendono a formarsi perché, a causa delle grosse dimensioni atomiche la sovrapposizione degli orbitali p è ridotta rispetto C=C.

Alcune interessanti conseguenze:

N_2 è una molecola biatomica, P_2 come molecola biatomica non esiste!!
Esiste P_4 .

CO_2 è una molecola con due doppi legami SiO_2 NO. SiO_2 forma una fitta rete di tetraedri SiO_4 con atomi di ossigeno in comune.